



TITLE:

8.電子ガスのDynamical Conelationによる多体問題の計算 (II)(II講義ノート,基研研究会報告)

AUTHOR(S):

大坂, 之雄

CITATION:

大坂, 之雄. 8.電子ガスのDynamical Conelationによる多体問題の計算
(II)(II講義ノート,基研研究会報告). 物性研究 1967, 8(4): D70-D77

ISSUE DATE:

1967-07-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/86059>

RIGHT:

電子ガスのDynamical Conelation による多体問題の計算(I)(II)

文 献

- 1) R.A.Ferrell, Phys.Rev.Letters 1 (1958) 443
- 2) W.J.Carr and A.A.Maradudin, Phys.Rev.133 (1964) 371
- 3) F.Brouers, Phys.stat .sol 19 (1967) 867
- 4) J.Hubbard, Proc.Roy.Soc.A243 (1957) 336
- 5) S.Ueda, Prog.Theor.Phys.26 (1961) 45
- 6) Y.Osaka, J.Phys.Soc.Japan 17 (1962) 546, 1322
- 7) A.J.Glick, Phy.Rev.129 (1963) 1399

電子ガスのDynamical Conelation による 多体問題の計算 (II)

東北大通研 大 坂 之 雄

与えられた題を二様に解釈して、二つの事に重点を置いて電子ガスの多体問題を論じよう。一つは、electron correlation の dynamical な部分の効果という意味で、Fermi liquid thory に基づいた最近の長波長、低振動の現象に対する計算を述べる。もう一つは、dynamic な correlation function の計算として、高振動のタテ誘電常数の計算、特に長波長 Plasmon の分散係数及び damping の計算を述べよう。

① 低振動、長波長の現象

相互作用をしている Fermion の系に、外部より波数 q 、角振動数 ω で特徴づけられる disturbance が加った時、 $q \ll k_F$ (Fermi波数) $\hbar\omega \ll E_F$ (Fermi energy) の時の現象は、Landau¹⁾の Fermi 流体理論により正しく記述され得る。この理論は He^3 に対して Landau により提案され、Silin²⁾により電子ガスに拡張され、その基礎づけは、Landau³⁾自身及び Nozier-Luttinger⁴⁾によりなされた。この理論の概要及び電子ガスへの応用について

以下述べる。

Ground state energy の、準粒子の分布函数 $n_{\sigma}(\mathbf{k})$ の微小変化 $n_{\sigma}(\mathbf{k}) \rightarrow n_{\sigma}(\mathbf{k}) + \delta n_{\sigma}(\mathbf{k})$ に伴う変化を (σ ; spin) 次のように表す。

$$\delta E = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \delta n_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} f_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta n_{\sigma}(\mathbf{k}) \delta n_{\sigma'}(\mathbf{k}') + \dots$$

これより準粒子の energy $\epsilon_{\mathbf{k}}$ 及び Landau function f (準粒子間の相互作用を記述する量) が導入される。この函数 f により, isotropic, translational invariance を有する系では, 比熱に表れる準粒子の Fermi 面での有効質量 m , スピン帯磁率 χ , 圧縮率 k (χ , k は $\omega = q = 0$ の応答と考えられる) は次のように表される。 ($\hbar = 1$)

$$\left. \begin{aligned} \frac{m}{m^*} &= 1 - \frac{2 k_F m}{(2\pi)^3} \int_{-1}^1 (2f_0(\theta) + f_e(\theta)) \cos \theta d(\cos \theta) \\ \chi_0 / \chi &= \frac{m}{m^*} + \frac{2 k_F m}{(2\pi)^3} \int_{-1}^1 f_e(\theta) d(\cos \theta) \\ \chi_0 / \chi &= \chi_0 / \chi + \frac{2 k_F m}{(2\pi)^3} \int_{-1}^1 2f_0(\theta) d(\cos \theta) \end{aligned} \right\} \quad (1.1)$$

ここに $f_{\sigma\sigma'}(|\mathbf{K}|=|\mathbf{K}'|=k_F, \theta) = f_0(\theta) + f_e(\theta) \delta_{\sigma\sigma'}$ (θ は \mathbf{K}, \mathbf{K}' の間の角) と表した。 m は自由電子の mass, χ_0, χ は non-interacting system の χ, χ である。[metal の場合, 並進対称性のため生ずる m の式は用いられず, m は self-energy part より求めれば良い。 χ, χ に対する式はちょっとした式の拡張で成立]

上記の条件を充す q, ω で表される外部電場に対する系の応答は, Fermi 流体の Kinetic eq で調べられ得る。

$$\begin{aligned} \delta n(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\mathbf{k}} \delta n(\mathbf{k}; \mathbf{r}, t) \\ \frac{\partial \delta n(\mathbf{k})}{\partial t} + \frac{S}{2} \left(\frac{\partial \delta n(\mathbf{k})}{\partial r_a} \frac{\partial \sigma_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{\partial k_a} - \frac{\partial \delta n(\mathbf{k})}{\partial k_a} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{\partial r_a} \right) &= I(\mathbf{n}, \mathbf{k}) \\ - \frac{\partial \sigma_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})}{\partial r_a} &= e(\epsilon_t)_a \quad (\epsilon_t \text{ 電子に働く total field (外場 + induced field)}) \end{aligned}$$

(collision term $I(\mathbf{n}, \mathbf{k})$ の形は, Landau の原論文及び 5) を参照)

collision term を考えず, この式を δn について linearize した場合の正当化が Luttinger-Nozier によりなされた。磁場の効果も考えて, 上式を

電子ガスのDynamical Conclation による多体問題の計算II)

拡張すれば長波長，低振動の種々の collective mode が論ぜられる。最近，⁶⁾ 磁場中のスピン波が，実験により見出された。

collision term の基礎づけは，Resibois⁷⁾ 及び Watabe⁸⁾ によりなされている。準粒子間の三体 collision を考えない範囲では正当化されよう。Kadanoff-Baym⁹⁾ の generalized Boltzmann eq^o，本質的には同じものであるが，その間の対応は必ずしも明かでない。準粒子の二体 collision の範囲で，Kinetic eq は多分正当化されるであろうから，種々の transport Phenomenon (non-linear も含めて) への electron correlation の効果を調べる事は，Landau function f を求める事に帰着されよう。〔non-linear の時は δE の δn_q による高階の微分も必要であろう。二体 collision term には f (ω -limit) と関係のある F (q -limit) が表れる。〕

それでは f の計算はどうするか！ 電子ガスの時 n_k は non-interacting particle の分布函数と同じであるから， f の定義より摂動で計算した適当な近似で求めた ground state energy を non-interacting particle の分布函数で微分して得られる。例えば，Bubble 近似の ground state energy



(以下—は自由電子のグリーン函数，~~~~ は RPA の相互作用

= + ---○--- ~~~~ は bare coulomb interaction)

をとれば，

$$f_e(p, p') \rightarrow \begin{array}{c} p' \\ \uparrow \\ p \end{array} \begin{array}{c} p \\ \uparrow \\ p' \end{array} \quad f_0(p, p') \rightarrow \begin{array}{c} p \\ \uparrow \\ p \end{array} \begin{array}{c} p' \\ \uparrow \\ p' \end{array} + \begin{array}{c} p \\ \uparrow \\ p \end{array} \begin{array}{c} p' \\ \uparrow \\ p \end{array}$$

となる。〔 $f_0(p=p'=p_F)$ は $\frac{4\pi e^2}{|p-p'|^2 \epsilon_{RPA}(p-p', 0)}$ で，static な誘電

常数が表れる。これが，10) の計算に対応し，Watabe¹¹⁾ の計算はこの立場での高次の補正を入れたもの〕

この f による κ と m の計算を図 1 に示す。(Heckler¹²⁾, Hawann¹³⁾ 計算より対応する量を用いた。)

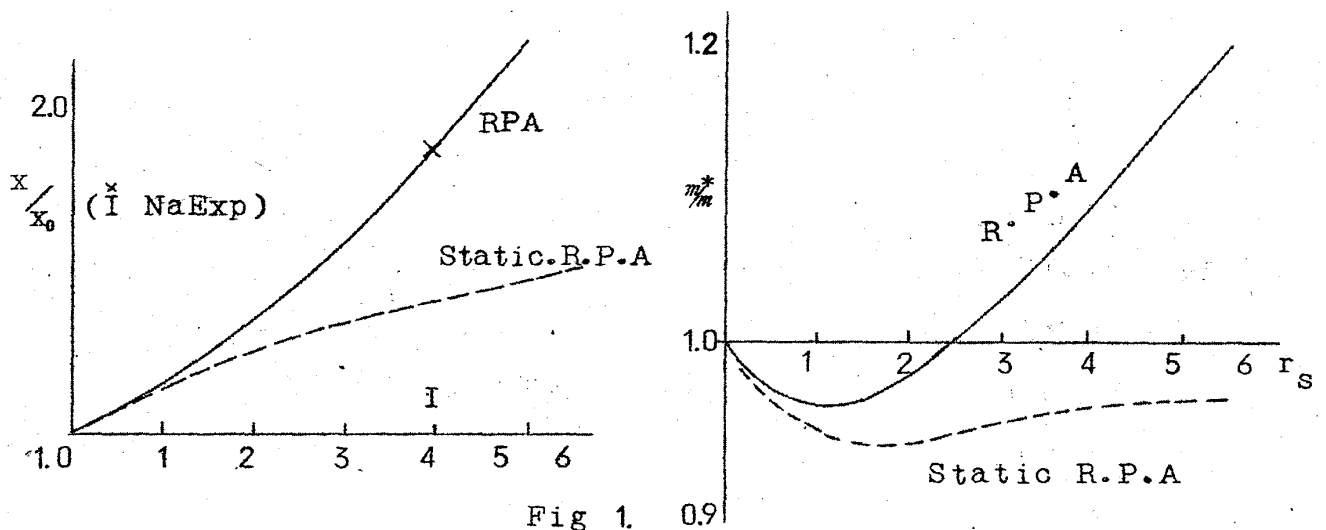
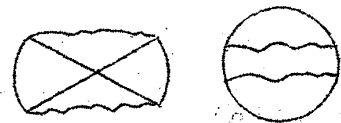


Fig 1.

m^* に electron-phonon の寄与を更に加えればNa ($r_s = 4$)の実験値 ($m^* = 1.27m$)を良く説明する。 x (electron-phonon 寄与なし) は spin-Paramagnetic resonance による実験値 (Na) ($x/x_0 = 1.7$)に近い。(Knight-shift による実験値はNa では1.15 位で大分ずれる。最所の spin-wave の data の解析では、 x/x_0 (Na)の最大値は1.35位である) 図の static RPA とは f_0 に表れる $\epsilon_{RPA}(q, \omega)$ を static のもので近似した結果で、この近似が定性的模様を変える事を図1は示している。Rice¹⁴⁾は bubble 近似の補正としてHubbard 近似を採用した。しかし、注意すべき事は ground state energy を摂動計算のある所で打切って f を求めることは consistentな結果に導くが、Rice のように値自身を適当な近似ですりかえる事は consistent な結果を与えない。(Rockmore¹⁵⁾が x に対して Sampson-Seitz 的計算と Landau 的計算が bubble diagram に対する同じ結果を与える事を示しているがこのような同等性がHubbard 近似を採用すると破れてしまう。) f にもっと近似を上げるには、次のオーダーの ground state energy として



を考えればよい。
低振動、長波長の現象は殆んど f の計算に帰着される故、上記のような f の計算の収束がどの程度よいか研究する事が望まれる。[metal の場合、 n_k^0 は non-interacting の分布函数と同じでない。このような系では true Fermi 面を与えるような自由粒子的ハミルトニアンを導入し、それへ摂動計算をなしその結果で self-consistent に最初のハミルトニアンを定め n_k^0 を近似的に与えればそれから以下の計算は電子ガスの場合と同様に行われよう]

② 長波長 Plasmon の分散関係及び damping

実際の plasma freq ω_p ($\omega_p = \frac{4\pi n e^2}{m}$) は, E_F のオーダーであるから, Fermi 流体理論は用いられない。このような時は, 始めから diagram 的に計算するしか方法がない。長波長 ($q \ll q_c$; q_c : plasma の cut-off 波数) Plasmon の分散関係はタテ誘電常数 (retarded) $\epsilon_\ell(q, \omega)$ を計算し $\epsilon_\ell(q, \omega) = 0$ を充す $\omega(q)$ を求めることである。 $\omega_q = \omega_p + q^2(A - iB) + O(q^4)$ の q^2 の項にのみ以下着目する。(この q の展開は $(\frac{q v_F}{\omega_p})^2$ の展開で $q \ll q_c$ のみ成立もの)

$$H = H_0 + H_1$$

$$H_0 = \sum_{k\sigma} \epsilon^0(k) a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} \quad H_1 = \frac{4\pi e^2}{V} \sum_{q \neq 0} \frac{1}{q^2} p_q p_{-q} \quad (V; \text{体積}) \quad (2.1)$$

の電子ガスのハミルトニアンで

$$\epsilon_\ell(q, \omega) = 1 + i \frac{4\pi e^2}{q^2 V} \int_0^\infty e^{(i\omega - \gamma)t} dt \langle [p_q(t), p_{-q}] \rangle_p \quad (2.2)$$

と表される。($\gamma=0$) $\langle \rangle$; ground state についての平均 p はその proper 部分) これより $\omega(q)$ を q^2 のオーダー迄計算する事は (2.2) の右辺の積分を q^2 迄計算する事になる。(2.2) は次のように書き換えられる。

$$\epsilon_\ell(q, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} - i \frac{4\pi}{V\omega^2} \int_0^\infty e^{(i\omega - \gamma)t} dt \langle [j_q^e(t), j_q^e] \rangle_p \quad (2.3)$$

$$j_q^e = \frac{e}{m} \sum_{k\sigma} (k_\ell + \frac{q}{2}) a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} \quad (k_\ell \text{ は } k \text{ のタテ成分})$$

(2.3) に基づいて $\epsilon_\ell(q, \omega)$ を RPA で計算する τ は, (2.3) の積分として

($\therefore j^e$)

迄計算して q で展開すればよい。

DuBois¹⁶⁾ は Plasmon の damping を $\epsilon_\ell(q, \omega)$ を経由せず次のようにして計算した。

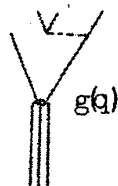
$$\frac{1}{q \cdot \omega} = \frac{1}{\omega^2} + \sum_{p+q} \frac{g(p, q)}{\omega^2 - [\epsilon^0(p+q) - \epsilon^0(p)]^2} + \frac{g(q)}{\omega^2 - \omega_0^2(q)}$$

の事より例えば electron ガスの self-energy の計算は electron-phonon によるその計算と analogous になる。

$$\left[\text{---} \overbrace{\text{---}}^{\text{---}} \text{---} = \text{---} \overbrace{\text{---}}^{\text{---}} \text{---} + \frac{g(p,q)}{g(p,q)} \overbrace{\text{---}}^{\text{---}} \text{---} + \frac{g(q)}{g(q)} \overbrace{\text{---}}^{\text{---}} \text{---} \right]$$


この逆の Plasmon damping は phonon damping と analogous に

例えば



と計算する。

r_s の lowst order では上の graph が一番効く。 $\omega(q) = \omega_p + 0q^2 + i \frac{\Gamma(q)}{2}$

で $\frac{\Gamma(q)}{2\omega_p q^2} \propto (v_s q^2 + 0(q^4))$ (DuBois は計算の error で $\sqrt{v_s} q^2$ の結果を得た) Niuham¹⁷⁾ は DuBois の計算を訂正し  を考えて Al の実験に一致する値を得るが彼の計算は余りに粗い。

(上述の j_q^e に基づく計算及び Niuham の計算は、 q についての展開が必ず必要で、この間見掛上 q で展開出来ない項が生ずる。Niuham はこの点 q で見掛上展開出来ない項を全て落して計算する。)

ここでは exact な式 (2.3) で始めから q で展開する方法を用いる。

(2.3) は q^2 迄正しい範囲で

$$\epsilon_\ell(q, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} - i \frac{4\pi}{V\omega^2} \int_0^\infty (i\omega - \gamma) t \cdot j_q^e(t) \cdot j_q^e(t) dt + 0(q^4) \quad (2.4)$$

となる。

$$j_q^e = \frac{e}{m} \sum_{k\sigma} k_e a_{k+q\sigma}^* a_{k\sigma}$$


(2.4) で時間について部分積分し q^2 迄正しく求めると次式を得る。

$$\epsilon_\ell(q, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \left(1 + \frac{2q^2}{\omega_m^2} \frac{\langle H_0 \rangle}{N} \left(1 + \frac{2}{15} \frac{\langle H_1 \rangle}{\langle H_0 \rangle} \right) \right) - i \frac{4\pi e^2 q^2}{V\omega^4 m^2} \left(\frac{16}{9} \right) \int_0^\infty (i\omega - \gamma) t dt \langle [H_1(t), H_1] \rangle + 0(q^4) \quad (2.5)$$

Plasmon damping は右辺の H_1 の correlation function の部分より生ずる。この部分への分散への寄与を考えないと、 $\langle H_0 \rangle \langle H_1 \rangle$ としてハートリフオア近似の値をとると Kana zawa-Misawa-Fujita による 分散関係への

electron coulotion 効果の式を得る。

$$\frac{\omega(q)}{\omega_p} = 1 + \frac{3}{10} \frac{q^2}{\omega_p^2} F(r_s) + O(q^4) \quad (2.5)$$

で、Kana zawa et al の結果は $F(r_s) = 1 - \frac{ar}{3\pi} s$ である。 $\langle H_0 \rangle, \langle H_1 \rangle$ と
して  の範囲での値を採用すると Kana zawa et al の結果と大分ずれて
 $rs > 2$ で $F(r_s) \geq 1$ である。damping の方は二体 correlation のみ考慮する
近似で

$$\begin{aligned} \Gamma(q, 2\omega_p) &= i \frac{2\pi}{9} \frac{q}{(1 \frac{4\pi^2}{3})} \omega_p^2 G(\omega = \omega_p) + O(q^4) \\ G(\omega > 0) &= \frac{1}{\pi} \sum_{q'} \frac{1}{q'^4} \int_0^\infty d\omega' \frac{(\text{Im} Q(q', \omega')) \eta(\omega - \omega') \text{Im} Q(-q', \omega - \omega')}{|\epsilon(q', \omega')|^2 |\epsilon(-q', \omega - \omega')|^2} \\ \eta(z) &= \begin{cases} 1 & (z > 0) \\ 0 & (z < 0) \end{cases} \quad \epsilon(q', \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} Q(q', \omega) \end{aligned}$$

を得る。 ϵ として ϵ_{RPA} を採用した計算が望ましいが、high Density limit
での値のみ計算した。その値は Niuham の計算より可成小さい値を与える。〔

〔Niuham の結果は High Density limit の式を $A\ell$ の場合 ($rs=2$)

実験とはそのまま外挿すれば 60 倍になるが、我々の場合のは 5 倍位で、RPA
の ϵ を採用すれば実験に可成近づくと思われる〕

実験との比較にはバンド効果によるものも考えないと数値迄問題に出来ないだ
ろう。(これは八王子の話をまとめる際、実際の話とは順序を変えてまとめた)

References

- 1) L.D.Landau ; JETP, 3 920 ('56) 5 101 ('57)
- 2) V.P.Silin ; " 6 387 ('58)
S.Misawa ; Prog. Theo. Phys. 27 840 ('62)
- 3) L.D.Landan ; JETP 8 70 ('59)
- 4) P.Nozier and J.M Luttinger ; P.R 127 1423, 1431 ('62)
P.Nozier ; Interacting Fermi Systems (w.A.Benjamin)

- 5) A.A.AbrikosoV and I.M.Khalatnikov ; JETP6 888(.58)
- 6) P.M.Platzmann and P.A.Wolf ; P.R.L 18 280 (.67)
S.Schuetz et al ; P.R.L 18 283 (.67)
- 7) P.Resibois ; P.R.138 B281 ('65), Bell Acad.Sci Belgique
51 1288 ('65)
- 8) M.Watabe and R.Dagonmer; P.R.143 110 ('66)
- 9) L.P.Kadanoff and G.Baym ; Quantum Statistical Mechanics
(W.A.Berjamin)
- 10) A.J.Glick ; P.R.129 1399 ('63)
Y.Osaka ; J.Phys.Sor. Japan. 17547 ('62)
- 11) M.Watabe ; Prog.Theo. Phys 29 519 ('63)
- 12) L.Hedin ; P.R 139 A 796 ('65)
- 13) D.R.Hamanss ; P.R 143 183 ('66)
- 14) T.M. Rice ; Ann.Phys 31 100 (.65)
- 15) R.M.Rorkmore ; P.R 129 926 ('63)
- 16) D.F.DuBois ; Ann Phys 8 24 ('59)
- 17) B.W.Niubom ; P.R.145 209 ('66)
- 18) H.Kanazawa,S.Misawa and E.Fujita ; Prog Tho.Plys 23 426
(.66)